自对偶地图上的伊辛模型及相变临界点

张孝伍
(青岛理工大学理学院,山东 青岛 266520)
E-mail:zxwaa@qut.edu.cn

摘要：给定连通地图$M=(V,E,F)$，在每个节点v处赋于一个自旋，每条边上的两个节点有相互作用，得到地图M上的伊辛模型.由伊辛模型的对偶变换，给出了自对偶地图上伊辛模型相变临界点K^*的上下界:$0.2406\le K^*\le 0.7218$，并且得到三维自对偶伊辛模型的相变临界点:$K^*=0.5269$.

关键词：连通地图;伊辛模型;对偶变换;相变临界点

Ising model and critical point of phase transition on self dual map

ZHANG Xiao-Wu

Abstract: Given connected map M=(V,E,F), each node V is assigned a spin, two nodes on each edge interact, the Ising model on map m is obtained.Dual transformation from Ising model, The upper and lower bounds of the critical point K* of the phase transition of Ising model on the self dual map are given:0.2406≤K*≤0.7218, the critical point of phase transition of the three-dimensional self dual Ising model is obtained:K*=0.5269.

Key words: Connected map; Ising model; Dual transformation; Critical point of phase transition

1 引言

设有连通地图[1] $M=(V,E,F)$，对每一个节点$v\in V$处赋于自旋σ_v，每条边$e=(u,v)$的两个节点之间有相互作用量$J_{(u,v)}$，如此得到地图M上的伊辛模型[2].

当地图$M=(V,E,F)$是一个环形图时，伊辛模型[3,4]是一维的，M是连通度大于3的平面图时，伊辛模型是二维的. M的亏格不等于1时，伊辛模型是三维以上的.

伊辛模型是统计力学的一个多体相互作用模型,可以用来描述非常广泛的物理现象.如晶体的磁性，合金中的有序无序转变和相变临界现象等.一维、二维伊辛模型都有精确解，目前为止,三维伊辛模型还没有得到精确解[5].用低温展开、高温展开、重整化群和Monte Carlo模拟等方法，能够得到三维伊辛模型的一些近似解[6,7,8].

参考文献中[5]介绍了三维伊辛模型的数学结构与精确解猜想，从拓扑、代数和几何角度对三维伊辛模型的数学结构进行了评述.分析了三维伊辛模型的转

移矩阵、拓扑理论中的纽结变换、Yang-Baxter 方程和四面体方程之间的关系.

文献[9]中给出了自对偶地图和无手征性纽结的构造方法，在文献中[10]，也给出了可逆纽结的构造方法. 纽结的无手征性就是对应于伊辛模型上的自对偶变换性，纽结的可逆性就是对应于伊辛模型格点之间相互作用的对称性.

文中利用地图M上伊辛模型的对偶变换，给出了自对偶地图上伊辛模型相变临界点的上下界，并且得到三维自对偶伊辛模型的精确相变临界点.

2 地图上伊辛模型的配分函数展开

设有连通地图$M=(V,E,F)$，其上伊辛模型的 Hamiltonian 量[2]是:

$$H\{\sigma_v\}=-\sum_{(u,v)\in E}\beta J_{(u,v)}\sigma_u\sigma_v-\mu\beta B\sum_{v\in V}\sigma_v$$

其中B是外加磁场,地图的每个节点v 是一个晶格,自旋$\sigma_v=\pm1$,每条边$e=(u,v)$上两个节点之间的相互作用量是$J_{(u,v)}$，$\mu=2\mu_B\sqrt{s(s+1)}$ 是磁矩，s是磁量子数，$\beta=\dfrac{1}{k_BT}$ ，这里k_B是玻尔兹曼常数，T是晶格系统的温度.

设每条边上两个节点之间的相互作用量都是J，伊辛模型的配分函数是:

$$Q_N(B,T)=\sum_{v\in V}\sum_{\sigma_v}\exp[-H\{\sigma_v\}]=\sum_{\sigma_u}\sum_{\sigma_v}\prod_{(u,v)\in E}\exp[\beta J\sigma_u\sigma_v]\prod_{v\in V}\exp[\beta\mu B\sigma_v]$$

其中$\exp[x]=e^x$.

假设外加磁场强度$B=0$，$K=\dfrac{J}{k_BT}$ ，则 Hamiltonian 量是$H\{\sigma_v\}=-K\sum_{(u,v)\in E}\sigma_u\sigma_v$,

由于$(\sigma_u\sigma_v)^2=1$ ，$\exp[K\sigma_u\sigma_v]=e^{K\sigma_u\sigma_v}=chK+\sigma_u\sigma_v shK=chK(1+\sigma_u\sigma_v thK)$ ，配分函数为:

$$Q(|V|,T)=\sum_{v\in V}\sum_{\sigma_v}\exp[-H\{\sigma_v\}]=\sum_{\sigma_u}\sum_{\sigma_v}\prod_{(u,v)\in E}[chK(1+\sigma_u\sigma_v thK)]$$
$$=(chK)^{|E|}\sum_{\sigma_u}\sum_{\sigma_v}\prod_{(u,v)\in E}(1+\sigma_u\sigma_v w)\quad(w=thK).$$

将配分函数的乘积项展开得:

$$Q(|V|,T)=(chK)^{|E|}\sum_{\sigma_1=\pm1}\cdots\sum_{\sigma_{|V|}=\pm1}(1+w\sum_{(i,j)\in E}\sigma_i\sigma_j+w^2\sum_{(i,j)\in E}\sum_{(k,l)\in E}\sigma_i\sigma_j\sigma_k\sigma_l+\cdots).$$

设 $n(r)$ 是在给定晶格上使用 r 个键所能画出的图形数，且这些图形要求每个节点都是由偶数个键连接，则配分函数的高温展开是:

$$Q(|V|,T)=2^{|V|}(chK)^{|E|}\sum_{r=0}^{\infty}n(r)w^{r}\text{ , }(n(0)=1).$$

在基态下系统所包含的所有自旋都指向同一方向，对应总能量 $E_0=-J|E|$. 反转一个节点 v 的自旋，会减少 d_v 个同向最近邻对，同时产生了 d_v 反向最近邻对，系统的总能量增加了 $2d_vJ$，这里 d_v 是节点 v 的度数. 设 $|V|_{++}$ 表示两个自旋上-上最近邻对的总数目，$|V|_{--}$ 表示两个自旋下-下最近邻对的总数目，$|V|_{+-}$ 表示两个自旋上-下最近邻对的总数目，并且 $|V|_{++}+|V|_{--}+|V|_{+-}=|E|$，系统的 Hamiltonia 量为

$$H(|V|_{+-})=-J(|V|_{++}+|V|_{--}-|V|_{+-})=-J(|E|-2|V|_{+-})\quad.$$

配分函数的低温展开式是: $Q(|V|,T)=e^{K|E|}\sum_{r=0}^{\infty}m(r)e^{-2Kr}$, $(m(0)=1)$.

其中 $m(r)$ 表示这样的数目:设置晶格中 $|V|$ 个自旋方向，使之有 r 个反向最近邻对， $m(r)$ 表示的就是满足如此条件之设置的数目, $r=0$、d_v、$\cdots$.

3 伊辛模型配分函数的对偶变换

设有连通地图 $M=(V,E,F)$ ，对偶地图 $M^*=(V^*,E,F^*)$ ，且 $|V^*|=|F|,|F^*|=|V|$.

M^* 上的晶格是 M 上的对偶晶格，$|V|-|E|+|F|=\chi_M=\begin{cases}2-2\xi_M, M\text{可定向}\\ 2-\xi_M, M\text{不可定向}\end{cases}$.

其中 χ_M 是 M 的欧拉示性数， ξ_M 为 M 的亏格数.

从给定的晶格 M 出发，在这个晶格上有一个键数为 r 的闭圈图形， r 个键对应有 $n_M(r)$ 个闭圈, 构建它的对偶晶格 M^*，然后在闭圈内部的节点上给定某一方向的自旋，外部节点给定反方向的自旋. 这样所得的图形是对偶晶格上具有 r 个反方向最近邻对的闭圈图形， r 个反方向键对应有 $m_{M^*}(r)$ 个闭圈. 相反地， 晶格

M 上某图形具有 r 个反方向最近邻对，用路径长度为 r 的闭圈图形来表示， r 个反方向最近邻对对应有 $m_M(r)$ 个闭圈图形， 构建它的对偶晶格 M^*, 这个闭圈图形就是对偶晶格上的键数为 r 个的闭圈图形，r 个键对应有 $n_{M^*}(r)$ 个闭圈, 由地图的对偶性得： $n_M(r)=m_{M^*}(r)$， $m_M(r)=n_{M^*}(r)$.

设 $K^*=\dfrac{J}{k_B T^*}$ ， 以使得 $thK^*=e^{-2K}$， 即: $sh(2K)sh(2K^*)=1$.

$$Q_M(|V|,T)=e^{K|E|}\sum_{r=0}^{\infty}m_M(r)e^{-2Kr}=e^{K|E|}\sum_{r=0}^{\infty}n_{M^*}(r)(v^*)^r,\ v^*=thK^* \ .$$

$$Q_{M^*}(|F|,T^*)=2^{|F|}(chK^*)^{|E|}\sum_{r=0}^{\infty}n_{M^*}(r)(v^*)^r \ .$$

所以得到配分函数的对偶变换为: $Q_M(|V|,T)=2^{-|F|}(shK^*chK^*)^{-\frac{|E|}{2}}Q_{M^*}(|F|,T^*)$.

4 自对偶伊辛模型的相变临界点

若 $M^*=M$ ，则 M 是自对偶的地图，其上的晶格模型是自对偶的伊辛模型，这时有：

$$|V^*|=|F|=|V|,|V|-|E|+|V|=\chi_M,|E|=2|V|-\chi_M \ .$$

在临界状态时， $T=T^*$， $Q_M(|V|,T)=Q_{M^*}(|V|,T^*)$， $2^{-|F|}(shK^*chK^*)^{-\frac{|E|}{2}}=1$.

$$2^{-|V|}(shK^*chK^*)^{-\frac{|E|}{2}}=1,\ (sh(2K^*))^{-\frac{|E|}{2}}=2^{\frac{2|V|-|E|}{2}},\ sh(2K^*)=2^{1-2\frac{|V|}{|E|}}=2^{-\frac{\chi_M}{|E|}},$$

记： $k_M=-\dfrac{\chi_M}{|E|}=1-2\dfrac{|V|}{|E|}$ ， 则相变临界点 $K^*=\dfrac{1}{2}\ln(2^{k_M}+\sqrt{2^{2k_M}+1})$.

对于连通地图 M， $|V|-1\le|E|\le\dfrac{1}{2}|V|(|V|-1),\dfrac{2}{|V|-1}\le\dfrac{|V|}{|E|}\le\dfrac{|V|}{|V|-1}$.

$$-1\le 1-\frac{2|V|}{|V|-1}\le 1-2\frac{|V|}{|E|}\le 1-\frac{4}{|V|-1}\le 1,\ \text{所有}: \frac{1}{2}\ln(\frac{1}{2}+\sqrt{\frac{5}{4}})\le K^*\le\frac{1}{2}\ln(2+\sqrt{5}) \ .$$

自对偶地图 M 上伊辛模型的相变临界点 K^* 满足： $0.2406\le K^*\le 0.7218$.

对于三维伊辛模型，节点数 $|V|=mnl$ ，度数 $d_v=6$ ，边数 $|E|=3mnl$，设 M 在曲面上的嵌入是自对偶的地图，面数 $|F|=mnl,\chi_M=-mnl$，M 是六正则地

图. M 可定向时，亏格数$\xi_M=\frac{1}{2}(2+nml)=1+\frac{nml}{2}$，其中$nml$为偶数. M 不可定向时，$\xi_M=2+nml$.

于是有：$k_M==1-2\frac{|V|}{|E|}=\frac{1}{3}$，$K^*=\frac{1}{2}\ln(\sqrt[3]{2}+\sqrt{\sqrt[3]{4}+1})=0.5269$.

根据现有文献[5-8]，由 Monte Carlo 模拟和重整化群等近似方法得到相变临界点的近似值是:

$$K^*=\frac{J}{k_BT_C^*}=0.2174,0.22200,0.2216544,0.2217,0.3074$$

三维自对偶伊辛模型有较高的对称性和稳定性，其相变临界点 $K^*=0.5269$ 比模拟得到的临界点都要大，文献[5]中由二个猜想得的的 Curie 温度相变临界点，精确地存在于黄金点 $\exp(-2K_c^*)=\frac{\sqrt{5}-1}{2}=0.61800339887$，所得到的 $K_c^*=0.2406059$ 与文中的临界点下界精确值 $\frac{1}{2}\ln(\frac{1}{2}+\sqrt{\frac{5}{4}})=0.2406059$ 近似相等，两个临界点的误差很小.

5 结论

根据地图上伊辛模型的对偶变换和地图是自对偶的充要条件,本文得到了自对偶地图的上伊辛模型相变临界点 K^* 的上下界: $0.2406\le K^*\le 0.7218$，并且给出三维自对偶伊辛模型的相变临界点: $K^*=0.5269$.

参考文献

[1] 刘彦佩.地图的代数原理[M].北京:高等教育出版社,2006:1-108.

[2] R.K.Pathria,Paul D.Beale.统计力学(第三版)[M],方锦清，戴越 译. 北京:高等教育出版社,2017:445-500.

[3] 易 中.统计力学基础[M].北京:冶金工业出版社，2008:153-297.

[4] 沈惠川.统计力学[M].合肥:中国科学技术大学出版社,2011:268-356.

[5] 张志东.三维 Ising 模型的数学结构与精确解探索[J].金属学报,2016,52(10):1311-1325.

[6] 黄纯青,邓绍军.三维 Ising 模型的蒙特卡罗模拟[J].计算物理,2009,26(6):937-941.

[7] 陈小余.三维 Ising 模型矩阵解法的简化与近似解[J].物理学报,1995,44(9):1484-1488.

[8] 邵元智,蓝 图,林光明.三维动态 Ising 模型中的非平衡相变:三临界点的存在[J].物理学报,2001,50(5):942-947.

[9] 张孝伍.纽结的新伙伴:平图[J].淮南工业学院学报,2002,22(4),70-73 .

[10] 张孝伍.有向纽结的可逆性[J]. 青岛理工大学学报,2018,39(1):107-110.